

На правах рукописи

ЕРЁМИН Илья Михайлович

СПИНОВЫЕ ВОЗБУЖДЕНИЯ И ЭЛЕКТРОННЫЕ КОРРЕЛЯЦИИ В
НЕОБЫЧНЫХ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНЫХ СВЕРХПРОВОДНИКАХ

01.04.02 – теоретическая физика

АВТОРЕФЕРАТ

Диссертации на соискание учёной степени
доктора физико-математических наук

Казань- 2016

Работа выполнена на кафедре Теоретической физики ФГАОУ ВО
«Казанский (Приволжский) федеральный университет»

Официальные оппоненты:

Садовский Михаил Виссарионович, академик РАН, д. ф.-м. н., профессор.
Институт электрофизики Уральского отделения РАН, г. Екатеринбург.
Зав. лаб. теоретической физики.

Минеев Владимир Петрович, д. ф.-м. н., профессор.
Институт теоретической физики им. Л.Д. Ландау РАН, Г. Черногловка.
Главный научный сотрудник.

Аристов Дмитрий Николаевич, д. ф.-м. н., профессор.
"Курчатовский институт", Федеральное государственное бюджетное учреждение
Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова, г. Гатчина.
Ведущий научный сотрудник.

Ведущая организация: Международная межправительственная организация
Объединенный институт ядерных исследований, Лаборатория теоретической
физики им. Н.Н. Боголюбова, г. Дубна, Московская обл.

Научный консультант: **Кочелаев Борис Иванович**, д. ф.-м. н., профессор
кафедры теор. физики, Казанский (Приволжский) федеральный университет.

Защита состоится 29 сентября 2016 г. в 15.30 на заседании диссертационного совета
Д 212.081.15 при Казанском (Приволжском) федеральном университете по адресу:
420008, Казань, ул. Кремлёвская, д. 16а, ауд. 110.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке К(П)ФУ (г. Казань, ул.
Кремлевская, д. 35). Электронная версия размещена на официальных сайтах ВАК
при Министерстве образования и науки РФ (vak2.ed.gov.ru) и К(П)ФУ (krfu.ru)

Автореферат разослан июня 2016 г.

Учёный секретарь диссертационного совета
доктор физико-математических наук

М. В. Еремин

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы: Началом исследования явления необычной высокотемпературной сверхпроводимости считается 1986 год, после открытия швейцарскими физиками Джоном Беднорцем и Алексом Мюллером сверхпроводимости в слоистых купратах. Изучение этого явления дало толчок к развитию целых областей в физике таких как сильно-коррелированные электронные системы, квантовые фазовые переходы, магнетизм в квазидвумерных системах. По сравнению с обычными сверхпроводниками, где температуры перехода в сверхпроводящее состояние относительно низкие, считается, что механизм сверхпроводимости в купратах, где T_c достигает $\sim 160\text{K}$, не обязательно связан с электрон-фононным взаимодействием. Важная особенность купратов: родительские (недопированные) соединения не описываются обычной зонной теорией. Вместо предсказываемого обычной зонной теорией металлического состояния реализуется диэлектрическое с антиферромагнитным упорядочением спинов меди. При допировании магнитный порядок разрушается и возникает необычная сверхпроводимость, а также так называемая «псевдощелевая» фаза, природа которой всё ещё остаётся до конца невыясненной.

Необычная высокотемпературная сверхпроводимость на данный момент является бурно развивающейся областью физики конденсированного состояния. За время прошедшее с момента открытия сверхпроводимости в купратах, были синтезированы новые материалы с необычными сверхпроводящими, а также и магнитными свойствами, такие как Na_xCoO_2 , Sr_2RuO_4 , хотя температуры сверхпроводящего перехода в этих системах довольно низкие. Кроме того, были развиты новые экспериментальные методы, которые позволили прояснить некоторые аспекты «псевдощелевой» фазы в купратах.

В феврале 2008 года группа Хидео Хосоно обнаружила необычную высокотемпературную сверхпроводимость в соединениях на основе железа. В настоящий момент температура сверхпроводящего перехода в них достигает 55K (в

системе $\text{SmFeAsO}_{1-x}\text{F}_x$). Электронные корреляции, необычный магнетизм и сверхпроводимость, наличие спиновых и орбитальных степеней свободы - всё это присутствует в сверхпроводниках на основе железа и требует теоретического и экспериментального исследования. Ключ к пониманию необычной сверхпроводимости лежит в понимании роли сильных электронных корреляций, что предполагает развитие новых теоретических методов описания систем с одновременным существованием различных фаз.

Цель и задачи диссертационной работы: Диссертация посвящена теоретическому исследованию динамической спиновой восприимчивости и особенностей спин-флуктуационного механизма необычной сверхпроводимости в новых сверхпроводниках, выяснению роли электронных корреляций в этих системах. Для достижения поставленных целей было необходимо решить следующие задачи:

- 1) Для понимания спин-флуктуационного механизма куперовского спаривания необходим анализ сверхпроводимости, основанный на самосогласованных уравнениях типа Элиашберга с учетом взаимодействия через спиновые и зарядовые флуктуации в приближении Берка Шриффера (fluctuation exchange approximation). Известно, что данный механизм поддерживает идею о том, что симметрия сверхпроводящего параметра порядка имеет симметрию $d_{x^2-y^2}$ -типа, однако необходимо ещё выяснить перенормировку спектра квазичастиц, обусловленную рассеянием на спиновых флуктуациях.
- 2) Изучить в рамках самосогласованной теории особенности перенормировки спектра спиновых возбуждений при температурах ниже T_c и сопоставить результаты расчета с экспериментальными данными.
- 3) Для триплетного сверхпроводника Sr_2RuO_4 необходимо исследовать влияние спин-орбитального взаимодействия на спиновую восприимчивость в нормальной фазе. Кроме того необходимо понять, каким образом различие в продольных и поперечных компонентах восприимчивости может влиять на асимметрию параметра порядка сверхпроводящей щели.

- 4) Для сверхпроводников на основе железа необходимо построить минимальную теоретическую модель, позволяющую описывать возможные нестабильности электронной подсистемы. Необходимо проанализировать нестабильности системы путём анализа ренорм-групповых уравнений и определить доминирующие термодинамические фазы.
- 5) Для доминирующей сверхпроводящей нестабильности (s^{+-} -типа) необходимо проанализировать влияние сверхпроводимости на спиновую восприимчивость, спин-решётчную релаксацию, и сдвиг Найта. Кроме того, необходимо исследовать влияние немагнитной примеси на сверхпроводимость в системах на основе железа.
- 6) Для системы коллективизированных электронов в сверхпроводниках на основе железа необходимо исследовать структуру магнитного упорядочения волн спиновой плотности. В частности, необходимо выяснить, какие процессы приводят к снятию вырождения магнитных структур и установлению антиферромагнитного упорядочения спинов $(\pi,0)$ - или $(0,\pi)$ -типов.
- 7) Необходимо установить, почему магнитное упорядочение в железосодержащих сверхпроводниках не приводит к возникновению щели у одной из зон, пересекающих уровень Ферми. Это позволит понять, почему ферропниктиды остаются металлами и в магнитоупорядоченной фазе.

Методы исследования: В каждом из исследуемых классов веществ есть свои особенности, которые указывают, какие методы подходят для их адекватного описания. В диссертации используются методы функций Грина, диаграммная техника, методы ренорм-группы, а также компьютерные и аналитические вычисления.

Научная новизна: В представленной работе можно выделить следующие результаты.

1. Рассмотрено влияние эффекта необычной сверхпроводимости с $d_{x^2-y^2}$ -типом симметрии сверхпроводящего параметра порядка на спиновую восприимчивость в

дырочных и электронно-допированных купратах. Найдено, что гипотеза о $d_{x^2-y^2}$ -типе спаривания в сверхпроводящих купратах соответствует имеющимся экспериментальным данным по неупругому рассеянию нейтронов. Показано, что при учете ромбических искажений решетки сверхпроводящая щель $d_{x^2-y^2}$ -типа приобретает относительно небольшую примесь компоненты s-типа, что соответствует экспериментальным данным по особенностям в поведении так называемых спиновых резонансов в $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$. В рамках самосогласованного спин-флуктуационного подхода FLEX исследованы эффекты перенормировки дисперсии квазичастиц выше и ниже температуры сверхпроводящего перехода.

2. Исследовано влияние спин-орбитального взаимодействия на спиновую восприимчивость в системе Sr_2RuO_4 . Доказано, что за счёт спин-орбитального взаимодействия продольная компонента восприимчивости становится больше поперечной на антиферромагнитном волновом векторе. И наоборот, поперечная компонента больше продольной на малых волновых векторах.

3. Для сверхпроводников на основе железа построена теоретическая модель, позволяющая описывать возможные нестабильности электронной системы. Введены ренорм-групповые уравнения для вершинных частей взаимодействий (диаграмм) в электрон-дырочных и электрон-электронных каналах. Показано, что антиферромагнетизм и сверхпроводимость являются конкурирующими фазами, а также найдены веские аргументы в пользу того, что сверхпроводимость имеет так называемую расширенную симметрию s-типа (s^{++}).

4. Проанализировано влияние s^{++} -типа сверхпроводимости на спиновую восприимчивость, спин-решёточную релаксацию, сдвиг Найта. Исследовано влияние немагнитной примеси на сверхпроводимость в системах на основе железа. Обнаружено, что температура сверхпроводящего перехода зависит от соотношения между параметрами межзонного и внутризонного рассеяний на примесях. Доказано, что температурные зависимости спин-решёточной релаксации и сдвига Найта меняются с экспоненциального на степенное по мере увеличения температуры.

5. Для системы коллективизированных электронов в сверхпроводниках на основе железа исследована структура магнитного упорядочения волн спиновой плотности. Показано, что зарядовые флуктуации, а также и орбитальная структура (эллиптичность) электронных пакетов снимают вырождение магнитной структуры и устанавливают $(\pi, 0)$ или $(0, \pi)$ антиферромагнитное упорядочение спинов. Также установлено, что такое упорядочение не приводит к возникновению щели у одной из зон, пересекающих уровень Ферми. Это обстоятельство объясняет, почему ферропниктиды остаются металлами и в магнитоупорядоченной фазе.

Теоретическая и практическая значимость работы: Результаты, изложенные в диссертации, представляются важными для понимания физических свойств рассматриваемых соединений. В рамках единой модели рассчитан ряд важнейших характеристик новых необычных сверхпроводников, где магнитные спиновые флуктуации играют важную роль. Построенная теория позволяет систематически определять симметрию параметра порядка в новых сверхпроводниках и предсказывает новые системы, где может возникнуть необычная сверхпроводимость. Разработанный подход анализа магнитных и сверхпроводящих свойств является перспективным методом для обсуждения систем с коллективизированными электронами. Ряд предсказаний теории, таких как магнитная анизотропия восприимчивости, обусловленная спин-орбитальным взаимодействием в Sr_2RuO_4 , перенормировка квазичастичного спектра за счёт взаимодействия со спиновыми флуктуациями в купратах, наличие множества магнитных фаз в железосодержащих сверхпроводниках, подтверждены экспериментально.

Достоверность. В работе использованы хорошо зарекомендовавшие себя методы теоретической физики: метод функций Грина с использованием паркетной диаграммной техники, ренорм-групповой анализ, обобщённое приближение случайных фаз (FLEX). Результаты численных расчетов качественно поясняются с использованием простых модельных представлений на основе топологических

особенностей поверхности Ферми. Все работы по теме диссертации (всего их 23) прошли процедуру научного рецензирования в высокорейтинговых журналах.

Личный вклад автора. Все результаты, представленные в работе, получены лично автором или при его непосредственном участии.

Основные положения, выносимые на защиту:

1. Используя приближение обобщённых случайных фаз (Fluctuation Exchange approximation) рассчитано влияние необычной сверхпроводимости с $d_{x^2-y^2}$ -типом симметрии сверхпроводящего параметра порядка на спиновую восприимчивость в дырочных и электронно-допированных купратах при концентрации носителей близкой к оптимальной. В рамках спин-флуктуационного подхода (FLEX) построена самосогласованная теория перенормировки электронной дисперсии, обусловленная рассеянием носителей тока на спиновых и зарядовых флуктуациях, выше и ниже температуры сверхпроводящего перехода.

2. Построена теория анизотропии спиновой восприимчивости в системе Sr_2RuO_4 , обусловленная спин-орбитальным взаимодействием носителей тока. Доказано, что продольная компонента восприимчивости становится больше поперечной на антиферромагнитном волновом векторе и наоборот поперечная восприимчивость меньше продольной в случае малых волновых векторов.

3. Введена модель сосуществования и конкуренции магнитной и сверхпроводящей нестабильностей с учётом зарядовой неустойчивости, которая позволила описать нестабильности электронной подсистемы в сверхпроводниках на основе железа. Выведены и решены ренорм-групповые уравнения, из которых следует, что антиферромагнетизм и сверхпроводимость являются конкурирующими фазами, а также, что сверхпроводимость имеет расширенную симметрию s -типа (s^{+-}).

4. Построена теория спиновой восприимчивости, спин-решёточной релаксации, и сдвига Найта в сверхпроводниках на основе железа с s^{+-} -типом спаривания при наличии немагнитных примесей и многозонных эффектов.

5. Предложена модель формирования магнитной структуры и особенностей волн спиновой плотности в системе коллективизированных электронов в сверхпроводниках на основе железа. Она позволила объяснить снятие вырождения у магнитных структур и установление $(\pi,0)$ - или $(0,\pi)$ - типов антиферромагнитного упорядочения спинов вследствие зарядовых флуктуаций и эллиптичности электронных пакетов.

Апробация работы. Результаты диссертационной работы обсуждались на международных школах и конференциях (Казань-2005, Красноярск- 2006, Екатеринбург, 2007, 2010, 2016) С приглашёнными докладами выступал на конференциях: (“Eastmag-2004”Красноярск), XXX International Conference on Dynamical Processes in Solids (DYPROSO) (Чешский Крумлов, 2005); 5th International Conference on Stripes (Рим, 2006), Euro-Asian Symposium “Magnetism on Nanoscale” EASTMAG2007 (Казань, 2007), The International Conference on Quantum Phenomena in Complex Matter, Ettore Majorana Foundation and Centre for Scientific Culture (Эриче, Сицилия, 2008), International Workshop on Inelastic Neutron and X-Ray Scattering in Strongly Correlated Electron Systems, (Сендай, Япония, 2008), APS March Meeting, Condensed Matter Division, (Питсбург, 2009; Даллас 2011); International Conference on Magnetism (Карлсруэ, 2009); Materials and Mechanisms of Superconductivity 2012 Conference, (Вашингтон, США), International Conference on Strongly Correlated Systems (SCES 2013, Токио, Япония), International Workshop on Iron-Based Superconductors, (Институт физики Китайской Академии Наук, Пекин, КНР, 2014) International Conference on Interaction of Superconductivity and Magnetism in Nanosystems, ICSMN2015, (Москва, 2015) а также на научных семинарах кафедры теоретической физики Казанского федерального университета, КФТИ им. Е.К.Завойского, в научных центрах Гренобля, Парижа, Карлсруэ, Дрездена, Вюрцбурга, Магдебурга, Брауншвейга, Штуттгарта, Бристоля, Чикаго, Мэдисона, Сеула, Цюриха.

Публикации. Материалы диссертации опубликованы в 23-и статьях. Все они опубликованы в рецензируемых научных журналах [1–23].

Структура и объём диссертации. Диссертация состоит из введения, 4 глав и списка литературы, Объём диссертации составляет 228 стр., включая рисунки. Список литературы состоит из 188 наименований.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении обосновывается актуальность темы диссертации, сформулированы цель и научная новизна работы, приводится краткое содержание работы, перечисляются основные результаты.

В первой главе рассматривается спин-флуктуационный механизм сверхпроводимости и эффекты перенормировки электронного спектра за счёт взаимодействия электронов проводимости со спиновыми флуктуациями. К моменту выполнения данной работы были уже достигнуты значительные успехи в понимании явления высокотемпературной и необычной сверхпроводимости [24,25]. Появилась концепция куперовского спаривания на основе спин-флуктуационного механизма. Были уже получены экспериментальные данные, свидетельствующие о том, что в сверхпроводящих купратах параметр порядка является анизотропным. Более того были уже указания на то, что сверхпроводящий параметр порядка имеет симметрию d-типа. Качественное объяснение такой симметрии можно дать на основе концепции куперовского спаривания за счет обмена антиферромагнитными спиновыми флуктуациями [24-26].

Для описания дырочно- или электронно-допированных купратов в случае большого допирования, когда электронные корреляции достаточно слабы и система близка к ферми-жидкости, можно воспользоваться однозонной моделью Хаббарда

$$H = \sum_{\langle ij \rangle \sigma} t_{ij} (c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} + h.c.) + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}, \quad (1)$$

где $c_{i\sigma}^{\dagger}$ - оператор рождения электрона на узле i со спином σ , t_{ij} - интеграл переноса, учитывающий перескок на ближайшие и следующие за ближайшими соседями узлы в квадратной решётке, ε_k - дисперсия квазичастиц, а U - параметр кулоновского отталкивания электронов на одном узле. Отметим, что величина U не обязательно соответствует значению одноузельного кулоновского отталкивания для ионов меди, а представляет собой некую эффективную величину, которая получается при

проектировании многоорбитального гамильтониана плоскости CuO_2 на однозонную модель. Отдельно рассматриваются случаи дырочно- и электронно-допированных купратов. Предполагается, что одни и те же дырки (электроны) участвуют в образовании антиферромагнитных спиновых флуктуаций, а также и в образовании куперовских пар. Таким образом, спиновая восприимчивость, так же как и массовый оператор считаются самосогласованно. В частности, записываются уравнения Элиашберга в приближении FLEX (Fluctuation Exchange) [27-29], где компоненты массового оператора Σ_ν ($\nu=0,1,3$) (т.е. $\Sigma_0 = \omega(1-Z)$ - перенормировка массы, $\Sigma_3 = \xi$ - энергетический сдвиг, и $\Sigma_1 = \phi$ - сверхпроводящий параметр порядка) по отношению к компонентам матриц Паули τ_ν

$$\Sigma_\nu = N^{-1} \sum_{\mathbf{k}'} \int_0^\infty d\Omega V_{eff}(\mathbf{k}-\mathbf{k}', \Omega) \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega I(\omega, \Omega, \omega') A_\nu(\mathbf{k}', \omega'). \quad (2)$$

Здесь $V_{eff}(\mathbf{k}-\mathbf{k}', \Omega) = [P_s(\mathbf{k}-\mathbf{k}', \Omega) - (\delta_{\nu 1} - \delta_{\nu 0} - \delta_{\nu 3}) P_c(\mathbf{k}-\mathbf{k}', \Omega)]$,
 $P_s = (2\pi)^{-1} U^2 \text{Im}(3\chi_s - \chi_{s0})$, $\chi_s = \chi_s(1 - U\chi_{s0})^{-1}$ и $P_c = (2\pi)^{-1} U^2 \text{Im}(3\chi_c - \chi_{c0})$,
 $\chi_c = \chi_c(1 + U\chi_{c0})^{-1}$ -соответствующие спектральные плотности спиновых и зарядовых возбуждений, получаемые путём суммирования бесконечного ряда лестничных и петлевых диаграмм, изображённых на Рис.1.

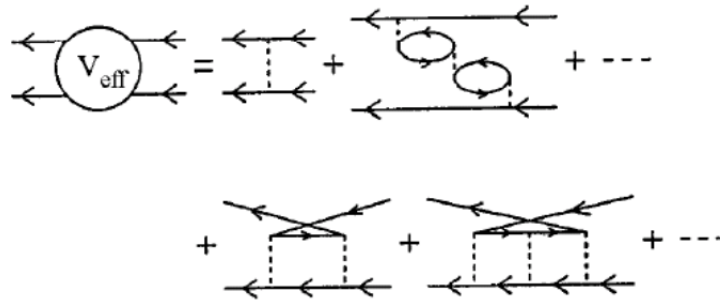


Рис.1 Уравнение Бете-Салпетера в канале частица-частица для сверхпроводимости без учёта перенормировки вершины (приближение FLEX). Пунктирные линии относятся к кулоновскому взаимодействию.

Ядро уравнения (2) и соответствующие спектральные функции определяются следующими формулами

$$I(\omega, \Omega, \omega') = \frac{f(-\omega') + b(\Omega)}{\omega + i\delta - \Omega - \omega'} + \frac{f(\omega') + b(\Omega)}{\omega + i\delta - \Omega - \omega'},$$

$$A_v(\mathbf{k}, \omega) = -\pi^{-1} \text{Im} [a_v(\mathbf{k}, \omega) / D(\mathbf{k}, \omega)],$$

где $D(\mathbf{k}, \omega) = [\omega Z]^2 - [\varepsilon_k + \xi]^2 - \phi^2$, и $a_0(\mathbf{k}, \omega) = \omega Z$, $a_3(\mathbf{k}, \omega) = \varepsilon_k + \xi$, $a_1(\mathbf{k}, \omega) = \phi$.

Цепочка самосогласованных уравнений замыкается уравнением Дайсона, $G^{-1}(\mathbf{k}, \omega) = G_0^{-1}(\mathbf{k}, \omega) - \Sigma(\mathbf{k}, \omega)$, а также выражениями для определения нулевых компонентов спиновой и зарядовой восприимчивостей

$$\text{Im} \chi_{s0, c0} =$$

$$\frac{\pi}{N} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' [f(\omega') - f(\omega' + \omega)] \sum_{\mathbf{k}} [N(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \omega' + \omega) N(\mathbf{k}, \omega') \pm A_1(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \omega' + \omega) A_1(\mathbf{k}, \omega')],$$

где мы ввели $N(\mathbf{k}, \omega') = A_0(\mathbf{k}, \omega') + A_3(\mathbf{k}, \omega')$. Дополнительно реальные части соответствующих функций Грина определяются с помощью соотношения Крамерса-Кронига.

В дальнейшем эти уравнения решаются численным методом самосогласованно для каждой температуры и допирования. Рассмотрены случаи электронного и дырочного допирования [1-3, 6-12]. Например, расчёт спиновой восприимчивости системы коллективизированных электронов показывает, что она имеет ярко выраженный пик на антиферромагнитном волновом векторе \mathbf{Q}_{AF} и частотах порядка ω_{SF} (так называемый парамагнетонный пик). При увеличении допирования этот пик сдвигается в сторону более высоких частот и становится менее выраженным, что указывает на ослабление антиферромагнитных флуктуаций. Это показано на Рис. 2 слева. Одновременно, расчёты $N(\mathbf{k}, \omega)$ для волновых векторов вдоль одного из направлений зоны Бриллюэна показывают (Рис.2 -правая панель), что групповая скорость носителей (определяемая для положения пиков в функции $N(\mathbf{k}, \omega)$) резко меняется для определённого значения энергии, что приводит к появлению кинка в дисперсии электронов. Этот многочастичный эффект связан с

взаимодействием носителей с парамагنونными возбуждениями и соответствующими перенормировками электронной дисперсии. При этом выделяются две области: $\omega > \omega_{SF}$ и $\omega < \omega_{SF}$ в поведении дисперсии квазичастиц, что соответствует данным по фотоэмиссии [30]. Интересно отметить, что парамагноны в отличие от, например магнонов, имеют сильное затухание и, строго говоря, являются возбуждениями континуума. Поэтому эффекты перенормировки электронной дисперсии при взаимодействии с континуумом довольно слабо выражены и соответствующий график не имеет характерного вида, который получается, например, при учете взаимодействия с фононами.

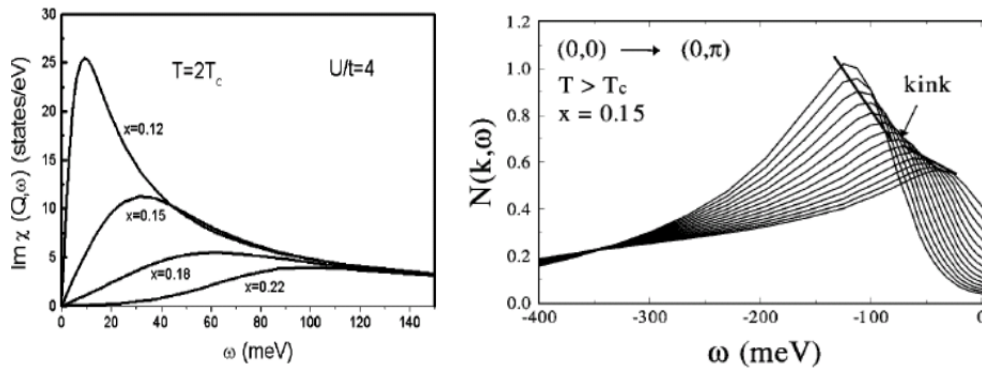


Рис.2 Рассчитанная динамическая спиновая восприимчивость в нормальной фазе, т.н. парамагнетонный спектр. Справа - поведение спектральной плотности $N(k, \omega)$ при оптимальном допировании в зависимости от частоты и волнового вектора вдоль $(0,0)-(0,\pi)$ направления зоны Бриллюэна.

Затем обсуждается, как перенормировки меняются в сверхпроводящей фазе. Показывается, что для электронно- и дырочно- допированных купратов реализуется $d_{x^2-y^2}$ -тип симметрии сверхпроводящего параметра порядка, что является следствием того, что взаимодействие через антиферромагнитные флуктуации приводит к отталкиванию между электронами. Куперовское спаривание возникает, так как параметр порядка зависит от импульса и при этом изменяет знак на тех участках поверхности Ферми, где взаимодействие максимально. Это и приводит к $d_{x^2-y^2}$ -типу спаривания. При этом из-за разницы в топологии поверхностей Ферми

функциональная зависимость сверхпроводящей щели от волнового вектора различна для электронно- и дырочно-допированных купратов. Если в дырочно-допированных купратах получаемая щель довольно хорошо описывается функцией $\frac{\Delta_0}{2}(\cos k_x - \cos k_y)$ (здесь Δ_0 - параметр щели), то в электронно-допированных купратах этой функции недостаточно и необходимо привлечение более высоких гармоник. Кроме того, обсуждается, при каком допировании сверхпроводимость исчезает в том и другом случае, приводятся фазовые диаграммы, а также проводится сравнение с экспериментальными данными.

Решая уравнения Элиашберга для температур сверхпроводящего перехода, мы также исследовали эффекты $d_{x^2-y^2}$ -типа спаривания на различные термодинамические характеристики. Один из самых ярких эффектов такой обратной связи - это формирование резонансного пика в мнимой части парамагнитной спиновой восприимчивости на частоте $\omega = \omega_{\text{RES}}$ и антиферромагнитном волновом векторе (Рис.3). Поясняется, каким образом этот эффект связан с тем, что на \mathbf{Q}_{AF} для $d_{x^2-y^2}$ -типа щели выполняется соотношение $\Delta_{\mathbf{k}} = -\Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}_{AF}}$.

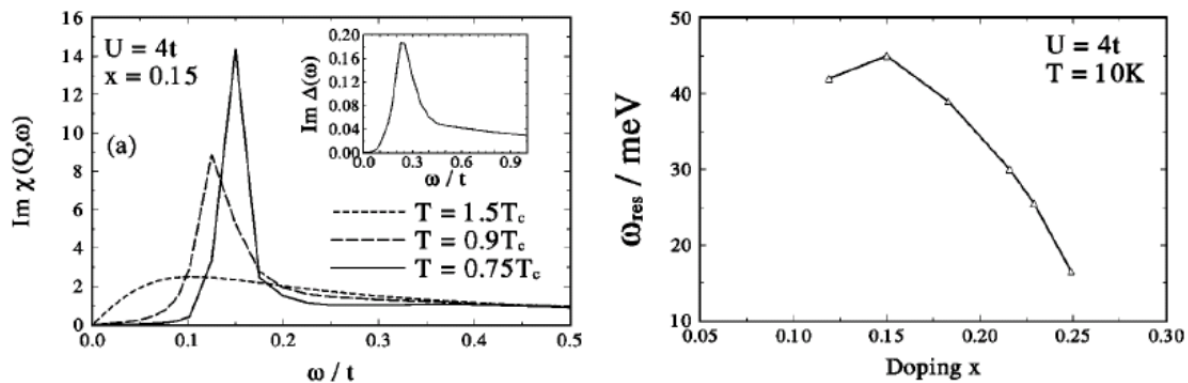


Рис.3. (а) Мнимая часть спиновой восприимчивости $\text{Im } \chi_s$ выше и ниже T_c . В вставке показана частотная зависимость мнимой части сверхпроводящей щели при $0.75T_c$. На правом рис. показана зависимость резонансной частоты от допирования.

Это приводит к тому, что фактор когерентности $1 - \frac{\varepsilon_k \varepsilon_{k+q} + \Delta_k \Delta_{k+q}}{E_k E_{k+q}}$ меняет знак, что приводит к усилению спинового отклика ниже T_c на энергиях порядка $\omega \sim 2\Delta_0$. Интересно отметить, что за счёт того, что в системе присутствуют сильные корреляции, т.е. большое U , полюс спиновой восприимчивости сдвигается от энергий порядка $2\Delta_0$ к меньшим значениям. Для этих энергий континуум (который приводит к затуханию) “защёлён”, и это ведёт к аномально большой интенсивности полюса, т.е. к появлению резонансного пика на энергии $\omega_{res} \leq 2\Delta_0$. Выясняется, что важной особенностью резонансного пика является то, что его появление связано со сверхпроводящей щелью определённой симметрии и возникает он только при $T < T_c$. Исследования зависимости резонансного пика от допирования показывают, что для передопированных образцов частота резонансного пика сдвигается в сторону низких энергий, что легко объясняется тем, что температура сверхпроводящего перехода и величина сверхпроводящей щели также уменьшаются. Соответственно резонансная частота также сдвигается в сторону более низких частот, как это видно на Рис. 3. Для недоопированных систем ситуация более сложная и в рамках Ферми-жидкостной теории имеет трудности для описания. Согласно экспериментальным данным резонансная частота пика смещается в сторону более низких энергий, в рамках же использованного нами Ферми-жидкостного приближения значение сверхпроводящей щели (а значит и резонансной частоты) по мере уменьшения концентрации носителей выходит на насыщение и практически не меняется.

Поведение спиновой восприимчивости в сверхпроводнике с $d_{x^2-y^2}$ -типом симметрии как функции импульса и частоты подробно обсуждается в работах [7-12]. В частности, показывается, что резонансный пик имеет очень необычную дисперсию, состоящую из двух веток, как видно на Рис. 4. Резонанс на антиферромагнитном волновом векторе возникает в силу двух причин. Из за того что $\Delta_k = -\Delta_{k+Q_{AF}}$ функция $\text{Im} \chi_{s0}$ испытывает подскок на энергиях порядка

$\Omega_c = (|\Delta_k| + |\Delta_{k+Q}|)_{hs}$ где индекс hs обозначает точки на ферми-поверхности, связанные антиферромагнитным волновым вектором \mathbf{Q} (таких точек 8 и энергия подскока Ω_c для всех пар из таких точек одна и та же). При этом реальная часть восприимчивости будет иметь логарифмическую расходимость на этой же частоте, а ниже иметь зависимость ω^2 . В полной восприимчивости возникает полюс, определяемый условием $1 = U \text{Re} \chi_{s0}$, что и приводит к возникновению резонанса. Для $\mathbf{Q} \neq \mathbf{Q}_{AF}$ вырождение между точками снимается. Возникают 3 характерные частоты Ω_{ci} , где восприимчивость $\text{Im} \chi_{s0}$ имеет подскок. Низкочастотный подскок соответствует прямым переходам с величиной $\mathbf{Q}_i = \eta(\pi, \pi)$. При $0.8 < \eta < 1$ такой волновой вектор по прежнему связывает на ферми-поверхности состояния, для которых $\Delta_k = -\Delta_{k+Q_i}$, однако, из-за особенностей ферми-поверхности величина сверхпроводящей щели для этих переходов меньше.

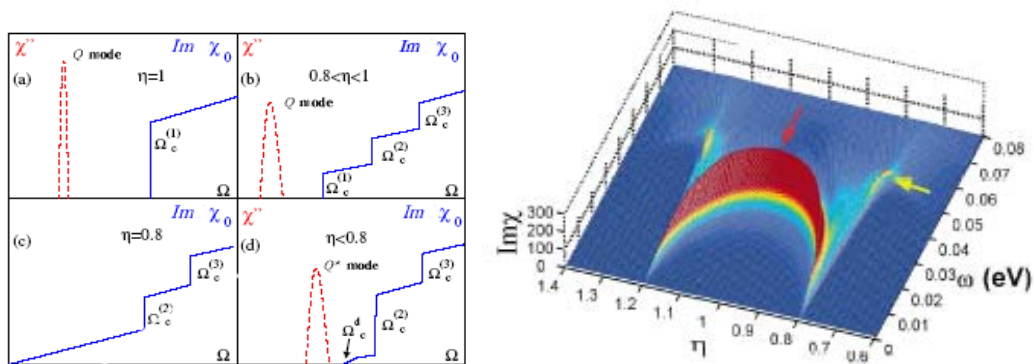


Рис.4 (а), (с)- иллюстрации возникновения спинового резонанса на разных волновых векторах. На правой части рис. показана рассчитанная нами спиновая восприимчивость как функция частоты и волнового вектора. Стрелками указаны Q- и Q'- моды.

Это приводит к сдвигу резонансного пика в сторону меньшей частоты при уменьшении \mathbf{Q}_i , т.е. с дисперсией вниз. При $\eta \sim 0.8$ волновой вектор \mathbf{Q}_i связывает нодальные точки ферми-поверхности, т.е. там, где сверхпроводящая щель обращается в ноль. Соответственно для этого волнового вектора спиновой резонанс

исчезает. При дальнейшем уменьшении η в $\text{Im} \chi_{s0}$ вновь возникает щель (изначально это т.н. прямая щель, но она быстро сравнивается по величине со второй характерной частотой) и резонанс вновь возникнет, но уже на больших частотах. Это связано с тем, что антиферромагнитные корреляции на этом векторе уже слабы, и резонанс может возникнуть только на величине $\Omega_{c2} = (|\Delta_k| + |\Delta_{k+Q_i}|)$, и будет при этом довольно слабым, т.е. быстро затухать в континууме. Так как две дисперсии разделены друг от друга удобно ввести понятия о Q- и Q'-модах. Полная структура дисперсии спинового резонанса изображена на Рис. 4. В диссертации обсуждается также структура резонанса в Q-пространстве и проводится сравнение с экспериментом. Экспериментальные данные для оптимально- и передопированных купратах можно вполне понять и описать в рамках данной теории [31].

Обсуждая особенности спин-флуктуационного сценария сверхпроводимости в электронно-допированных купратах и эффекты обратной связи в них [9-14], мы показываем, что в них также возникает резонансный пик из-за $d_{x^2-y^2}$ -типа спаривания. Однако из-за особенностей ферми-поверхности дисперсия резонанса очень слабо выражена.

Приведённая в первой главе теория имеет тот недостаток, что область её применения ограничена оптимально и передопированными купратами. Это связано с тем, что электронные корреляции начинают играть более важную роль вблизи перехода Мотта (т.е. при индексах допирования меньше оптимального). Судя по всему, в этой области ферми-жидкостной подход с рассеянием на антиферромагнитных флуктуациях не является оптимальным из-за близости к переходу метал-изолятор Мотта. В частности, при расчете динамической спиновой восприимчивости необходимо принять во внимание эффекты ближнего антиферромагнитного порядка, как это делается в теории квазидвумерных антиферромагнетиков а также запрещения двойного заполнения для фермионов из-за сильного Кулоновского отталкивания. Результаты усовершенствования теории в этом направлении приведены в работах [19,20,32-34].

Во **второй главе** обсуждается необычная сверхпроводимость и магнетизм в Sr_2RuO_4 . Результаты опубликованы в работах [4,5]. Температура сверхпроводящего перехода $T_c = 1.5 \text{ K}$ [35]. Данная система изоструктурна родительскому соединению ВТСП купратов La_2CuO_4 с квазидвумерной структурой и потому интересно сравнить их между собой. Кроме того, экспериментально известно, что Sr_2RuO_4 - ферми-жидкостная система, что оправдывает применение диаграммной техники, используемой в теории возмущений. В начале главы обсуждается электронная модель для описания низкоэнергетических свойств рутанитов. В частности, учитывается, что за счёт кристаллического поля $4d$ -состояния Ru^{4+} расщепляются на e_g -дублет и t_{2g} - триплет. Нижними по энергии являются состояния t_{2g} - триплета.

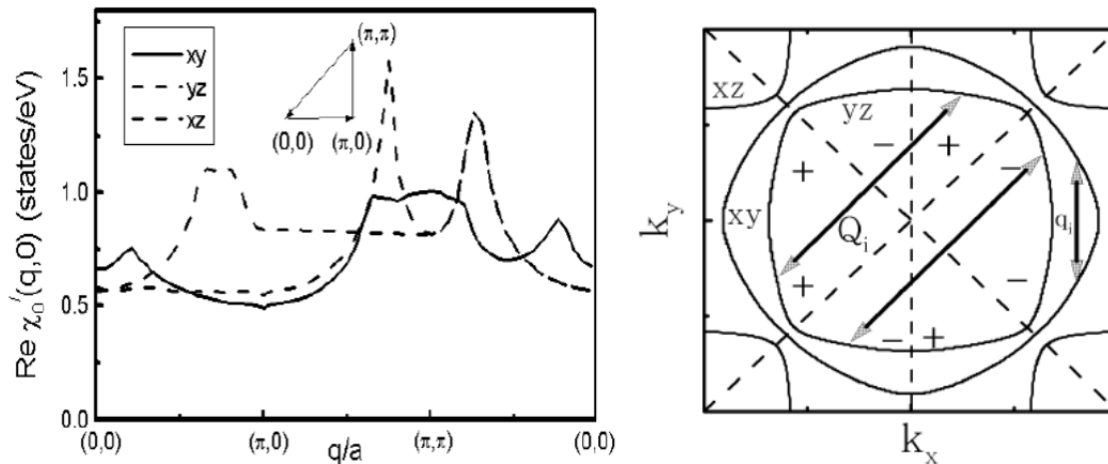


Рис.5. Реальные части восприимчивостей Линдхарда для 3-х подзон вдоль треугольного контура в зоне Бриллюэна. Контурсы Ферми изображены на правой панели. Из-за частичного нестинга xz- и yz-подзон восприимчивость имеет характерные пики на $\mathbf{Q}_i = (2\pi/3, 2\pi/3)$. Стрелками указаны соответствующие вектора рассеяния.

На базе состояний триплета формируются три зоны проводимости (обозначаемые как α , β , и γ -зоны). Исходной моделью является трёхзонная модель Хаббарда

$$H = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \sum_{\alpha} \varepsilon_{\mathbf{k}\alpha} a_{\mathbf{k}\sigma\alpha}^{\dagger} a_{\mathbf{k}\sigma\alpha} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} + (U' - J/2) \sum_{i, \alpha < \beta} n_{i\alpha} n_{i\beta} - 2J \sum_{i, \alpha < \beta} \mathbf{S}_{i\alpha} \cdot \mathbf{S}_{i\beta} \quad (10)$$

где $\alpha, \beta = xz, yz, xy$ обозначают соответствующие состояния t_{2g} - триплета. Параметры U и U' соответствуют одноузельному (внутриорбитальному) и межорбитальному кулоновским взаимодействиям, $n_{i\alpha}$ - операторы числа квазичастиц, а J - это параметр обменного взаимодействия спинов $S_{i\alpha}$. Сначала рассматриваются свойства невзаимодействующих электронов. В частности, показывается, что функция Линдхарда имеет характерные максимумы на волновом векторе $\mathbf{q} \sim 0$, а также и на волновом векторе, несоизмерном решётке $\mathbf{Q}_i = (2\pi/3, 2\pi/3)$.

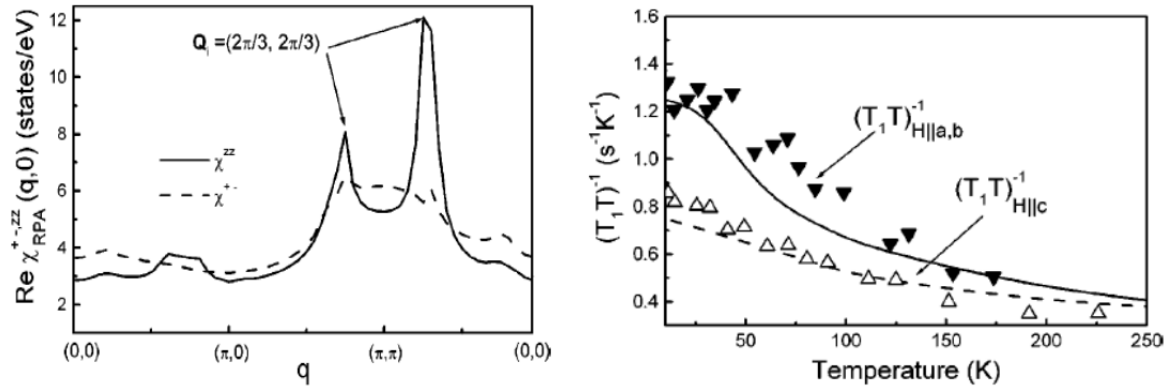


Рис.6. Рассчитанная реальная часть восприимчивости Линдхарда для Sr_2RuO_4 с учётом спин-орбитального взаимодействия. Справа - рассчитанное температурное поведение спин-решёточной релаксации для разной ориентации магнитных полей [4]. Экспериментальные данные взяты из [36].

Эти особенности связаны с топологией контуров Ферми (за счёт нестинга xz - и yz -зон (Рис. 5)). В результате в системе имеется нестабильность по отношению к двум типам упорядочения, и сверхпроводимость определяется в условиях конкурирования этих двух нестабильностей.

Имеются экспериментальные указания на существенную магнитную анизотропию в Sr_2RuO_4 . В следующей части главы обсуждается её учёт путём введения в гамильтониан спин-орбитального взаимодействия, действующего в пределах t_{2g} -состояний. Спин-орбитальное взаимодействие приводит к анизотропии магнитной восприимчивости, главным образом через анизотропию g -факторов. Рассчитанная спиновая восприимчивость показана в левой части Рис. 6. Видно, что в результате учёта спин-орбитального взаимодействия поперечная компонента

восприимчивости усилена вблизи «ферромагнитного» волнового вектора $\mathbf{q} \sim 0$, в то время как продольная компонента усилена вблизи «антиферромагнитного» волнового вектора $\mathbf{Q}_i = (2\pi/3, 2\pi/3)$. Данные результаты находятся в согласии с данными по температурной зависимости спин-решёточной релаксации ядер Ru [36]. В [36] отмечено, температурная зависимость скорости ядерной релаксации зависит от направления внешнего магнитного поля. При этом более сильная зависимость наблюдается для продольной компоненты, где ярко выражены антиферромагнитные флуктуации. Как видно на Рис.6, теоретические расчёты находятся в хорошем согласии с экспериментом.

В следующих параграфах этой главы обсуждается возможность куперовского спаривания в этих системах за счёт спиновых флуктуаций при наличии магнитной анизотропии. Путём анализа экспериментальных данных, а также и анализа роли спиновых флуктуаций делается вывод о том, что наиболее вероятна реализация триплетного параметра порядка в Sr_2RuO_4 . При этом возможна реализация нулей в сверхпроводящей щели по оси z . Интересно отметить, что триплетная сверхпроводимость в стронций рутаните по прежнему является актуальной темой. Отметим работы в которых исследовалось поведение эффекта Керра, наблюдаемого при куперовском спаривании не на зонном уровне а на орбитальном [37]. В наших расчетах мы предполагали куперовское спаривание на зонном уровне. На данный момент нет достаточных экспериментальных доказательств в пользу одного или другого сценария.

В **третьей главе** анализируются механизмы сверхпроводимости и антиферромагнетизма в новых сверхпроводниках на основе железа [38] на базе модели коллективизированных электронов [15-17]. При этом за основу берётся ферми-поверхность этих систем, которая состоит из небольшого электронного кармана (c -фермионы), центрированного около М-точки, и небольшого дырочного кармана (f -фермионы), центрированного около Г-точки зоны Бриллюэна (Рис. 7). Отмечается, что размеры этих карманов примерно равны при нулевом допировании, а при добавлении электронов или дырок в систему размеры карманов

становятся разными. В качестве основного взаимодействия между носителями рассматриваются кулоновское отталкивание с гамильтонианом вида

$$H_4 = U_1^{(0)} \sum_{i,\sigma} c_{\mathbf{p}_3\sigma}^+ f_{\mathbf{p}_4\sigma}^+ f_{\mathbf{p}_2\sigma} c_{\mathbf{p}_1\sigma} + U_2^{(0)} \sum_{i,\sigma} f_{\mathbf{p}_3\sigma}^+ c_{\mathbf{p}_4\sigma}^+ f_{\mathbf{p}_2\sigma} c_{\mathbf{p}_1\sigma} + \frac{U_3^{(0)}}{2} \sum_{i,\sigma} [f_{\mathbf{p}_3\sigma}^+ f_{\mathbf{p}_4\sigma}^+ c_{\mathbf{p}_2\sigma} c_{\mathbf{p}_1\sigma} + h.c.] + U_4^{(0)} \sum_{i,\sigma} [f_{\mathbf{p}_3\sigma}^+ f_{\mathbf{p}_4\sigma}^+ f_{\mathbf{p}_2\sigma} f_{\mathbf{p}_1\sigma} + c_{\mathbf{p}_3\sigma}^+ c_{\mathbf{p}_4\sigma}^+ c_{\mathbf{p}_2\sigma} c_{\mathbf{p}_1\sigma}] ,$$

Значения импульсов c и f -фермионов определяются по отношению к положению их ферми-поверхностей в зоне Бриллюэна. На начальном этапе расчетов величины параметров взаимодействия предполагается малыми. Затем анализируются возможные неустойчивости; волны зарядовой и спиновой плотности и сверхпроводимость. В модели две зоны проводимости. Можно анализировать возникновение волн плотности как с реальной, так и с мнимой компонентами. При этом сверхпроводимость возникает либо обычного s -типа или же так называемого s^{+-} типа. В последнем случае сверхпроводящая щель будет иметь постоянное значение на дырочном и электронном пакете, но при этом возникнет фазовый сдвиг на π , т.е. $\Delta_e = -\Delta_h$.

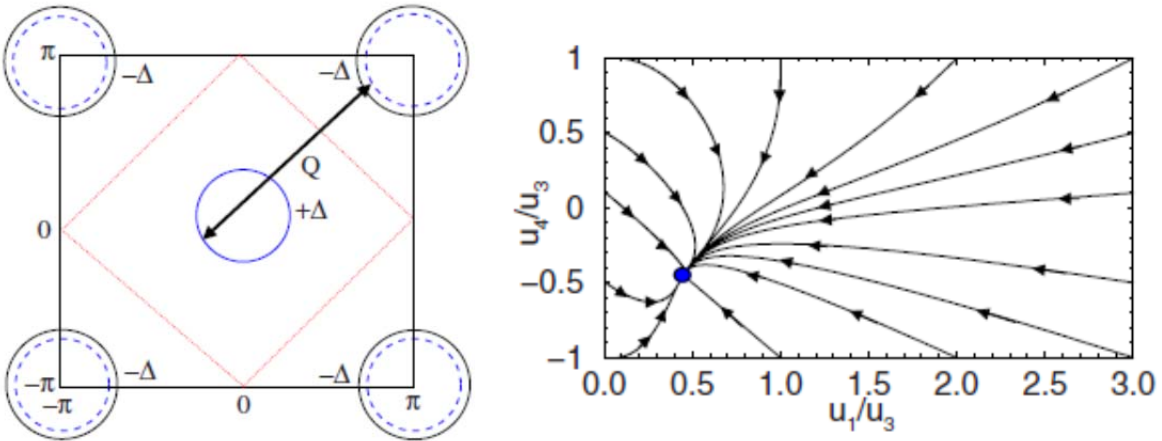


Рис.7 Упрощенная ферми-поверхность сверхпроводников на основе железа, состоящая из электронных и дырочных карманов вблизи Γ - и M -точек зоны Бриллюэна, соответственно. В системе наблюдается условие нестинга на антиферромагнитном волновом векторе $Q=(\pi,\pi)$. Δ и $-\Delta$ обозначают величины сверхпроводящих щелей для s^{+-} симметрии параметра порядка, пунктирная линия показывает положение нулей в щели. Справа - поведение (скейлинг) констант взаимодействий, как результат решения уравнений ренорм-группы.

Уравнения среднего поля, записанные для приведённой выше модели, детально анализируются. Показывается, что при наличии только отталкивания в системе могут возникнуть только волны зарядовой или спиновой плотности. Сверхпроводимость же на этом этапе не возникает, так как взаимодействие в системе только отталкивающее, а случай зависимости от импульса сверхпроводящей щели не рассматривается. Необходимо, однако, помнить, что данное рассмотрение, не является полным. Это связано с тем, что в случае нестинга (т.е. когда в электронно-дырочной функции отклика имеется логарифмическая расходимость на волновом векторе Q) имеется интерференция магнитной и стандартной куперовской неустойчивостей. В данном случае обычные приближения типа случайных фаз или среднего поля не являются адекватными, так как они соответствуют обычным лестничным приближениям, в то время как здесь возникает двойной логарифм (в электронно-дырочном канале и в канале частица-частица). В этой связи логично обратиться к паркетным (или ренорм-групповым) уравнениям, использованным в контексте обсуждения сверхпроводимости в купратах [39]. Этой задаче посвящена следующая часть четвёртой главы. В диссертации приводится вывод уравнений ренорм-группы для констант электрон-электронных взаимодействий для фермионов на Ферми-поверхностях, определённых выше. При учёте соответствующих диаграмм в канале электрон-дырка и электрон-электрон эти уравнения имеют вид [15]

$$\begin{aligned} \dot{u}_1 &= u_1^2 + u_3^2 \\ \dot{u}_2 &= 2u_2(u_1 - u_2) \\ \dot{u}_3 &= 2u_3(2u_1 - u_2 - u_4) \\ \dot{u}_4 &= -u_3^2 - u_4^2 \end{aligned} ,$$

где введено эффективное взаимодействие $u_i = U_i N(0)$ ($N(0)$ - плотность состояний), а \dot{u}_i - производная по $\log(W/E)$. W - ширина зоны проводимости, а E - энергетическая переменная, по которой проводится дифференцирование. Отметим, что похожие уравнения были в своё время получены для купратов при учете

перескоков только между ближайшими соседями [39]. Особенность этих уравнений в том, что в случае, если изначально $u_3 = 0$, то нестабильность в канале волн спиновой плотности (определяемая вершиной $\Gamma_{SDW}^{(r)} = u_1 + u_3$) преобладает, при этом тенденция к сверхпроводимости (определяемая вершиной $\Gamma_{SC}^{(+)} = u_4 - u_3$) уменьшается. Однако, если u_3 не равен 0, то в системе существуют обе нестабильности и система «плывёт» в критическую точку, как показано на Рис.7. Особенности этой критической точки следующие: абсолютное значение $|u_3|$ растёт в результате перенормировки быстрее всех остальных и становится больше u_1 на $\sqrt{5}$. Одновременно взаимодействие u_4 уменьшается, а затем меняет знак на отрицательный (притяжение) и в критической точке достигает значения $-|u_3|/\sqrt{5}$. Это приводит к тому, что $\Gamma_{SDW}^{(r)} = u_1 + u_3$ является основной неустойчивостью, однако сверхпроводящая нестабильность в s^{+-} -канале становится возможна за счёт изменения знака u_4 на низких энергиях вблизи ферми-уровня. При этом сверхпроводимость в s^{++} -канале $\Gamma_{SC}^{(++)} = u_4 + u_3$ остаётся неустойчивой, а значения $\Gamma_{SDW}^{(r)}$ и $\Gamma_{SC}^{(+-)}$ «плывут» в одну точку $u_3(1 + 1/\sqrt{5})$. Из данного анализа следует, что при нулевом допировании предпочтительным оказывается возникновение волны спиновой плотности. Однако если нестинг ухудшается (что происходит при добавлении электронов или дырок в систему, условие $\mathcal{E}_k^c = -\mathcal{E}_{k+Q}^f$ нарушается), то логарифмическая расходимость в канале частица-дырка подавляется за счёт ненулевого значения химического потенциала и нестабильность по отношению к возникновению волн спиновой плотности подавляется, при этом в сверхпроводимости с s^{+-} -симметрией она по-прежнему сильная, так как имеется стандартная нестабильность Купера.

В диссертации далее обсуждаются свойства сверхпроводника с s^{+-} -симметрией параметра порядка. В самом простом случае величины щелей одинаковы на

электронных и дырочных карманах, но при этом имеют противоположный знак. При решении уравнения БКШ выполняется стандартное соотношение $2\Delta/k_B T_c = 3.53$. Имеется, однако, два принципиальных отличия. Первое, это поведение сверхпроводника с s^{+-} -симметрией в присутствии немагнитных примесей. В отличие от обычного сверхпроводника с s^{++} -симметрией параметра порядка, где примеси не влияют на сверхпроводимость, здесь ситуация иная. В общем случае потенциал примеси $U(q)$ должен быть разбит на внутризонную $U(0)$ и на межзонную компоненту $U(\pi)$. В последнем случае примесь рассеивает электронные состояния с ферми-поверхностей, на которых знаки сверхпроводящих щелей противоположны (с $+\Delta$ и $-\Delta$). Соответственно уравнения Горькова имеют вид:

$$Z = 1 + \frac{U(0) + U(\pi)}{\sqrt{\bar{\Delta}_{\omega_m}^2 + \omega_m^2}}$$

$$\frac{\bar{\Delta}_{\omega_m}}{\Delta} - 1 = - \frac{b_T \bar{\Delta}_{\omega_m}}{\sqrt{\bar{\Delta}_{\omega_m}^2 + \omega_m^2}},$$

где $\Delta \equiv \Delta(T)$ - щель, не зависящая от частоты, $b_T = 2U(\pi)/\Delta(T)$. Данные уравнения исследуются в различных пределах. Показывается, что при увеличении $b_T < 1$ система ведёт себя так, будто в ней есть магнитные примеси. При $b_T \geq 1$ в системе возникает бесщелевая сверхпроводимость. Нами было получено выражение для T_c , аналогичное выражению Абрикосова-Горькова для обычного сверхпроводника s-типа.

Вторая причина принципиального отличия сверхпроводника с s^{+-} -симметрией от обычного сверхпроводника связана с поведением магнитных свойств ниже T_c . В частности за счёт смены знака щели при переходе с электронного на дырочный карман аномальное поведение фактора когерентности приводит к возникновению

резонансного пика в спиновой восприимчивости ниже T_c . Его частота определяется

$$\Omega^2 = \sqrt{v^2(\mathbf{q} - \mathbf{Q})^2 + \Omega_0^2}, \text{ где } v = v_F / \sqrt{2} \text{ и } \Omega_0 = 2\Delta \left(1 / \Gamma_{SDW}^{(r)} - \log E_F / E \right).$$

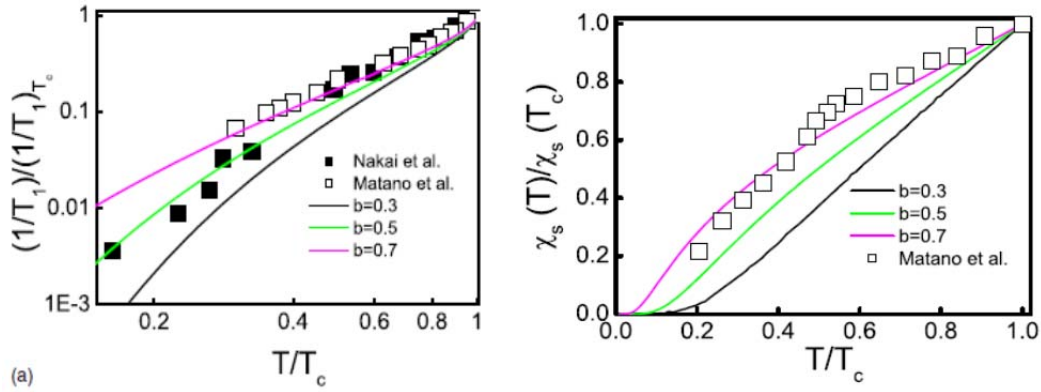


Рис.8. Рассчитанное поведение спин-решёточной релаксации в сверхпроводящей фазе в сверхпроводнике s^{++} -типа для разных значений b_T . Квадратики соответствуют экспериментальным данным [40,41]. Справа - расчётные температурные зависимости однородной восприимчивости при вариации величины b . Экспериментальные данные взяты из [41].

Далее рассматривается поведение ядерной спин-решёточной релаксации и сдвига Найта в сверхпроводнике s^{++} -типа с немагнитными примесями. Формула для расчета скорости ядерной релаксации имеет вид

$$\frac{1}{T_1} \propto T \sum_{\mathbf{q}} \left| \frac{\text{Im} \chi_s(\mathbf{q}, \Omega)}{\Omega} \right|_{\Omega \rightarrow 0} \propto T \sum_{\mathbf{q}} \chi_s^2(\mathbf{q}, 0) \left[\frac{\text{Im} \chi_s(\mathbf{q}, \Omega)}{\Omega} \right]_{\Omega \rightarrow 0}.$$

Это выражение анализируется в случае, когда в системе имеется нестабильность по отношению к антиферромагнетизму, и показывается, что релаксация будет относительно слабой. Пик Хебеля-Сликтера, обычно возникающий при $T = T_c$, будет отсутствовать здесь за счёт того, что фактор когерентности будет подавлен. Одновременно за счёт наличия примесей поведение релаксации будет также отличаться при температурах ниже T_c . В частности, за счёт того, что примеси приводят к ненулевой плотности состояний при энергиях ниже Δ . Температурная зависимость спин-решёточной релаксации будет не экспоненциальной.

Аналитическое выражение для скорости ядерной релаксации (без учёта вершинных поправок в случае внутризонного рассеяния на примесях и $U(0) > \Delta$) имеет вид

$$\frac{1}{T_1} = \frac{1}{T_1} \bigg|_{T_c} \int_0^\infty \frac{dx}{4 \cosh^2 \frac{x}{2T}} \left(1 - \frac{|\bar{\Delta}|^2 - x^2}{\sqrt{(|\bar{\Delta}|^2 - x^2)^2 + 4x^2 (\bar{\Delta}'')^2}} \right).$$

Результаты численного расчета в сравнении с экспериментальными данными показаны на Рис.8. В заключительной части 3-ей главы рассматривается влияние примесей на температуру сверхпроводящего перехода, а также и на температурную зависимость однородной восприимчивости.

В **четвёртой главе** рассматриваются особенности магнитной фазы сверхпроводников на основе железа [18,21-23]. В начале главы рассматривается модель с одним ионом железа на элементарную ячейку. Ферми-поверхность в этом случае состоит из двух дырочных карманов, центрированных около точки $\Gamma=(0,0)$, и двух эллиптических карманов, центрированных около точек $(\pm\pi,0)$ и $(0,\pi\pm)$ (Рис. 8). В данном случае имеются два вырожденных параметра порядка волн спиновой плотности (ВСП) $\vec{S} = \vec{\Delta}_1 e^{i\mathbf{Q}_1 \mathbf{R}} + \vec{\Delta}_2 e^{i\mathbf{Q}_2 \mathbf{R}}$ с векторами упорядочения $\mathbf{Q}_1=(\pi,0)$ и $\mathbf{Q}_2=(0,\pi)$, соответственно. Магнитная структура состоит из двух антиферромагнитных подрешёток, вложенных друг в друга, но при этом угол между подрешетками, а также и общее значение намагниченности в каждой из них заранее неизвестны. Рассматривается, каким образом в системе снимается вырождение и почему в системе возникает порядок $\mathbf{Q}_1=(\pi,0)$ или $\mathbf{Q}_2=(0,\pi)$, т.е. ферромагнитное упорядочение по одному направлению и антиферромагнитное - по другому направлению.

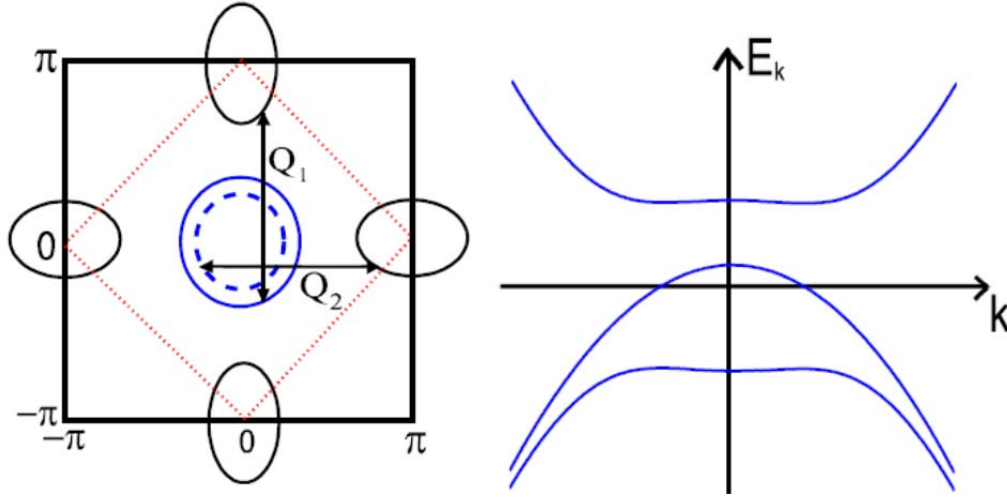


Рис.9. Слева: поверхность Ферми в модели с одним ионом железа на элементарную ячейку. Вектора $\mathbf{Q}_1=(\pi,0)$ и $\mathbf{Q}_2=(0,\pi)$ соответствуют двум эквивалентным нестабильностям в системе. Справа: энергетический спектр в фазе ВСП вблизи Г-точки зоны Бриллюэна. Несмотря на наличие ВСП одна из двух дырочных зон остается бесщелевой.

Дырочная ферми-поверхность соответствует α_1 -зоне, а через β_1 и β_2 обозначаются электронные зоны. Параметры порядка волн спиновой плотности имеют вид

$$\vec{\Delta}_1 = (0, 0, \Delta_1^z) \quad \text{и} \quad \vec{\Delta}_2 = (\Delta_2^x, 0, \Delta_2^x) \quad , \quad \text{где} \quad \Delta_1^z = -(U_1 + U_3) \sum_{\mathbf{k}} \langle \alpha_{1\uparrow}^+ \beta_{1\uparrow} \rangle \quad \text{и}$$

$$\Delta_2^{z(x)} = -(U_1 + U_3) \sum_{\mathbf{k}} \langle \alpha_{1\uparrow}^+ \beta_{2\rho\uparrow(\downarrow)} \rangle .$$

Используя модель, развитую в предыдущей главе, показывается, что в случае, когда размеры пакетов одинаковы и взаимодействие происходит только между электронными и дырочными карманами, гамильтониан среднего поля может быть диагонализирован путём последовательных унитарных преобразований. В результате две из трёх участвующих зон оказываются “защелёнными” эффективной щелью $\Delta^2 = (\vec{\Delta}_1)^2 + (\vec{\Delta}_2)^2$, но при этом оставшаяся зона оказывается такой же, как и до взаимодействия (Рис. 9). На следующем этапе расчета анализируется магнитная структура при учёте (слабого) взаимодействия между электронными пакетами. Его параметризация аналогична той, которая была использована в предыдущей главе

$$\begin{aligned}
H_4^{ex} = & U_6 \sum \beta_{1p_3\sigma}^+ \beta_{2p_4\sigma'}^+ \beta_{2p_2\sigma'} \beta_{1p_1\sigma} + U_7 \sum \beta_{2p_3\sigma}^+ \beta_{1p_4\sigma'}^+ \beta_{2p_2\sigma'} \beta_{1p_1\sigma} \\
& + U_7 \sum \beta_{2p_3\sigma}^+ \beta_{1p_4\sigma'}^+ \beta_{2p_2\sigma'} \beta_{1p_1\sigma} + \frac{U_8}{2} \sum [\beta_{2p_3\sigma}^+ \beta_{2p_4\sigma'}^+ \beta_{1p_2\sigma'} \beta_{1p_1\sigma} + h.c.] .
\end{aligned} \quad (11)$$

Наличие слабых взаимодействий не меняет структуру уравнений среднего поля на возникновение ВСП, однако меняет свободную энергию системы. Учитывая вклад этих взаимодействий в фазе ВСП, получаем

$$E_{gr}^{ex} = 2A^2 [U_6 + U_8 - U_7 - U_4] \frac{|\vec{\Delta}_1|^2 |\vec{\Delta}_2|^2}{\Delta^4} + 4A^2 U_7 \frac{(\vec{\Delta}_1 \cdot \vec{\Delta}_2)^2}{\Delta^4}, \quad (12)$$

где величина A положительна и не равна нулю в фазе ВСП. Анализ выражения (12) показывает, что если все взаимодействия между электронными пакетами одинаковы, то единственная поправка к полной энергии определяется скалярным произведением двух параметров порядка. В данном случае энергия минимизируется, когда $(\vec{\Delta}_1 - \vec{\Delta}_2)^2 = (\vec{\Delta}_1 + \vec{\Delta}_2)^2$. Анализируя намагниченность, легко показать, что при этом абсолютная величина намагниченности на каждой подрешётке становится одинаковой, однако угол между намагниченностями остаётся незафиксированным, т.е. вырождение остаётся таким же, как и в локализованной модели с взаимодействиями J_1 и J_2 .

В следующих параграфах главы анализируется возможность того, что взаимодействия между электронными пакетами становятся неодинаковыми и при этом общий вклад в полную энергию остается положительным. Кроме того, анализируется роль эллиптичности электронных пакетов. В частности, учёт эллиптичности приводит во втором порядке по теории возмущений к следующим поправкам

$$E_{gr}^{ex} = C |\vec{\Delta}_1|^2 |\vec{\Delta}_2|^2, \quad C = \delta^2 \frac{m\mu^2}{4\pi\Delta^4},$$

где $m_x = m(1+\delta)$ и $m_y = m(1-\delta)$, а $\mu \gg \Delta$ - химический потенциал. Как видно, константа C положительна, что приводит к решению, что либо $\vec{\Delta}_1 = 0$, либо $\vec{\Delta}_2 = 0$.

Это немедленно определяет магнитный порядок, который будет либо с вектором $\mathbf{Q}_1=(\pi,0)$ или с вектором $\mathbf{Q}_2=(0,\pi)$, что соответствует экспериментально наблюдаемому упорядочению.

В следующей части главы проводится аналогичный анализ, но при этом взаимодействия предполагаются не в канале плотность-плотность, а в магнитном канале. Для определенности считается что это антиферромагнитные взаимодействия спинов между ближайшими (J_1) и следующими за ближайшими (J_2) соседями.

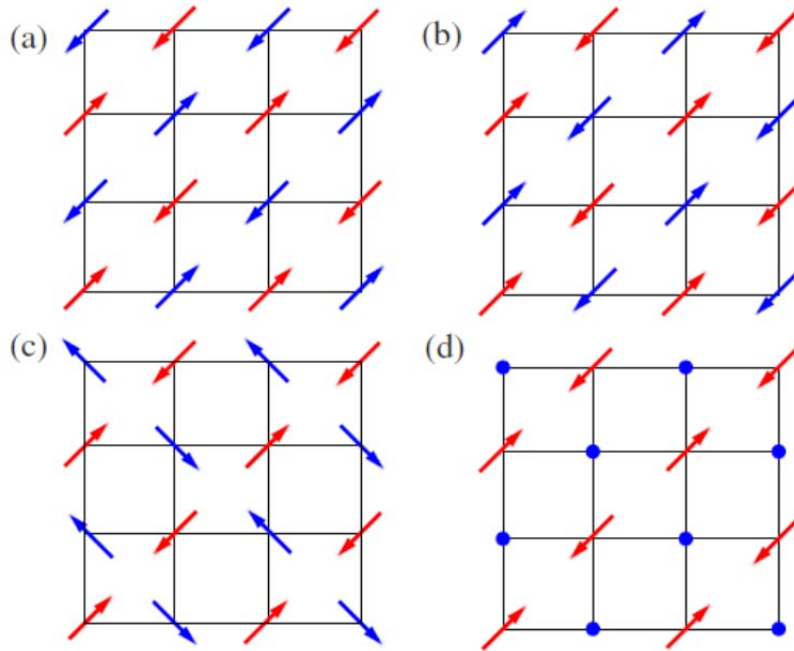


Рис.10 Возможные спиновые конфигурации $\vec{S} = \vec{\Delta}_1 e^{i\mathbf{Q}_1 \mathbf{R}} + \vec{\Delta}_2 e^{i\mathbf{Q}_2 \mathbf{R}}$. В отсутствие эллиптичности и взаимодействия между электронными пакетами зафиксированной остаётся только величина $\Delta^2 = (\vec{\Delta}_1)^2 + (\vec{\Delta}_2)^2$. (a) и (b) соответствуют $(0,\pi)$ и $(\pi,0)$ упорядочению, (c) $\vec{\Delta}_1 \perp \vec{\Delta}_2$, (d) $\vec{\Delta}_1 \parallel \vec{\Delta}_2$.

Поверхности Ферми остаются такими же, как на Рис.9. В этом случае поправки к полной энергии оказывается равной:

$$E_{gr}^{ex} = 4A^2 \left[4J_1 \frac{|\vec{\Delta}_1|^2 |\vec{\Delta}_2|^2}{\Delta^4} - (J_1 + 3J_2) \frac{(\vec{\Delta}_1 \cdot \vec{\Delta}_2)^2}{\Delta^4} \right]$$

Из-за того, что теперь множитель перед $(\vec{\Delta}_1 \cdot \vec{\Delta}_2)^2$ стоит со знаком минус, следует,

что $\vec{\Delta}_1 \parallel \vec{\Delta}_2$. При $J_1/4 < J_2 < J_1$ реализуется $(\pi, 0)$ или $(0, \pi)$ порядок, а при большем значении J_2 возникает ситуация, когда намагниченность на одной из подрешёток полностью компенсируется (Рис. 10d). Данные расчёты указывают на критическую роль зарядовых флуктуаций в формировании $(0, \pi)$ или $(\pi, 0)$ упорядочений в системе коллективизированных электронов с взаимодействием.

В заключении главы проводится сравнение полученной электронной структуры с имеющимися экспериментальными данными по фотоэмиссии. Показано, что если два дырочных пакета становятся неэквивалентными, то имеется интервал сил взаимодействий, при которых пара дырочных и электронных пакетов перемешиваются, образуя ВСП, в то время как другая пара остается неизменной. Как следствие этого, в реконструированной (folded) зоне Бриллюэна (с одним ионом Fe на ячейку), которая обычно используется для описания эксперимента, имеется по одной дырочной и электронной зоне с перемешанными состояниями из-за ВСП. Одна из них наблюдается в области точки $(0, 0)$, а другая около точки . Эффект появления ВСП проявляется через когерентные факторы, которые влияют на интенсивность ARPES. Появляются новые пересечения зонных состояний с уровнем Ферми из-за образования ВСП, что согласуется с экспериментальными данными по углоразрешающей фотоэмиссии.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ:

1. Рассмотрено влияние эффекта необычной сверхпроводимости с $d_{x^2-y^2}$ -типом симметрии сверхпроводящего параметра порядка на спиновую восприимчивость в дырочных и электронно-допированных купратах. В рамках спин-флуктуационного механизма сверхпроводимости в купратах исследованы эффекты перенормировки электронной дисперсии выше и ниже температуры сверхпроводящего перехода, а также поведение спиновой восприимчивости и возникновение так называемого спинового резонанса.

2. Изучено влияние спин-орбитального взаимодействия на спиновую восприимчивость в системе Sr_2RuO_4 . Показано, что за счёт спин-орбитального взаимодействия продольная компонента восприимчивости становится больше поперечной, что оказывает влияние на транспортные и магнитные свойства этого соединения.

3. Для сверхпроводников на основе железа построена теоретическая модель, позволяющая описывать возможные нестабильности системы. Путём анализа полученных ренорм-групповых уравнений показано, что антиферромагнетизм и сверхпроводимость являются конкурирующими фазами, а также, что сверхпроводимость имеет так называемую расширенную симметрию s-типа (s^+).

4. Проанализировано влияние s^+ -типа сверхпроводимости на спиновую восприимчивость, спин-решёточную релаксацию, сдвиг Найта в железо содержащих сверхпроводниках. Исследовано влияние немагнитной примеси на сверхпроводящие свойства.

5. Для системы коллективизированных электронов в сверхпроводниках на основе железа исследована структура магнитного упорядочения в виде волн спиновой плотности. Показано, что зарядовые флуктуации, а также и эллиптичность электронных пакетов снимают вырождение магнитной структуры и устанавливают $(\pi, 0)$ или $(0, \pi)$ антиферромагнитное упорядочение спинов. Также

установлено, что такое упорядочение не приводит к возникновению щели у одной из зон, пересекающих уровень Ферми. Это позволило объяснить, почему ферропниктиды остаются металлами и в магнитоупорядоченной фазе.

Список статей по теме диссертации

1. Manske, D. Theory for Electron-Doped Cuprates Superconductors: *d*-wave symmetry order parameter/ D. Manske, I. Eremin, K.H. Bennemann // Phys. Rev. B – 2000. – V. 62. – P. 13922-13925.
2. Manske, D. Analysis of resonance peak and magnetic coherence seen in inelastic neutron scattering of cuprate superconductors: A consistent picture with tunneling and conductivity data/ D. Manske, I. Eremin, K. H. Bennemann // Phys. Rev. B. – 2001. – V. 63. – P. 054517(4p).
3. Manske, D. Analysis of the Elementary Excitations in High- T_c cuprates: Explanation of the New Energy Scale Observed by Angle-Resolved Photoemission Spectroscopy/ D. Manske, I. Eremin, K.H. Bennemann K.H.// Phys. Rev. Lett. – 2001. – V. 87. – P. 177005 (4p).
4. Eremin, I. Electronic theory for the normal state spin dynamics in Sr_2RuO_4 : anisotropy due to spin-orbit coupling/I. Eremin, D. Manske, K.H. Bennemann// Phys. Rev. B. – 2002. – V. 65. – P. 220502(R) (4p).
5. Eremin, I. Electronic theory for superconductivity in Sr_2RuO_4 : triplet pairing due to spin-fluctuation exchange/ I. Eremin, D. Manske, C. Joas, K.H. Bennemann K.H. // Europhys. Lett. – 2002. – V. 58. – P. 871-877.
6. Manske, D. Renormalization of the elementary excitations in hole- and electron-doped cuprates due to spin fluctuations/D. Manske, I. Eremin, and Bennemann K.H.// Phys. Rev. B. – 2003. – V. 67– P. 134520 (12p).
7. Eremin, I. Novel neutron resonance mode in *d*-wave superconductors/ I. Eremin, I., D.K. Morr, A.V. Chubukov, K.H. Bennemann, M.R. Norman // Phys. Rev. Lett. – 2005. – V. 94. – P. 147001 (4p).
8. Eremin, I. Spin excitations in layered cuprates: a Fermi-liquid approach/ I. Eremin, D. Manske // *ΦHT*. – 2006. – T. 32. – C. 683-699.
9. Ismer, J.-P. Resonance peak in electron-doped cuprates/ J.-P. Ismer, I. Eremin, E. Rossi, D.K. Morr // Phys. Rev. Lett. – 2007. – V. 99. – P. 047005 (4p).

10. Eremin, I. Spin susceptibility in bilayered cuprates: resonant magnetic excitations/ I. Eremin, D.K. Morr, A.V. Chubukov, K.-H Bennemann// Phys. Rev. B. – 2007. – V. 75. – P. 184534 (9p).
11. Eremin, I. Signatures of non-monotonic d-wave gap in electron-doped cuprates/ I. Eremin, E. Tsoncheva, A.V. Chubukov A.V.// Phys. Rev. B. – 2008. – V. 77. – P. 024508 (7p).
12. Rowe, W. Spin excitations in layered antiferromagnetic metals and superconductors/ W. Rowe, J. Knolle, I. Eremin, P.J. Hirschfeld // Phys. Rev. B. – 2012. – V. 86. – P. 134513 (12p).
13. Guarise, M. Anisotropic softening of magnetic excitations along the nodal direction in superconducting cuprates/ M. Guarise, B. Dalla Piazza, H. Berger, E.Giannini, T. Schmitt, H.M. Rönnow, G.A. Sawatzky, J. van den Brink, D. Altenfeld, I. Eremin, and M.Grioni, // Nature Comm. – 2014. – V.5 –P. 5760-5764.
14. Rowe, W. Doping asymmetry of superconductivity coexisting with antiferromagnetism in spin fluctuation theory/ W. Rowe, I. Eremin, A. Rømer, B.M. Andersen, P.J. Hirschfeld // New J. Phys. – 2015. – V. 17. – P. 023022 (9p).
15. Chubukov, A.V. Magnetism, superconductivity, and pairing symmetry in Fe-based superconductors/ A.V. Chubukov, D. Efremov, I. Eremin // Phys. Rev. B. – 2008. –V. 78.– P. 134512 (10p).
16. Ahn, F. Superconductivity from repulsion in LiFeAs: novel s-wave symmetry and potential time-reversal symmetry breaking/ F. Ahn, I. Eremin, J. Knolle, V.B. Zabolotnyy, S.V. Borisenko, B. Büchner, A.V. Chubukov // Phys. Rev. B. – 2014. – V. 89. – P. 144513 (14p).
17. Chubukov, A. Raman response in a superconductor with extended s-wave symmetry: application to Fe-pnictides/ A. Chubukov, I. Eremin, M. M. Korshunov // Phys. Rev. B. – 2009.– V. 79.– P. 220501(R) (4p).
18. Knolle, J. Magnetic resonance from the interplay of frustration and superconductivity/J. Knolle, I. Eremin, J. Schmalian, R. Moessner // Phys. Rev. B. – 2011. – V. 84. – P. 180510 (4p).

19. Еремин, М.В. Динамическая спиновая восприимчивость дырочных ВТСП в модели синглетно-коррелированной зоны проводимости/ М.В. Еремин, А. А. Алеев, И.М. Ерёмин // ЖЭТФ. – 2008. – Т. 133. – С. 1-13.
20. Еремин, М.В. О взаимосвязи магнитных восприимчивостей локализованных и коллективизированных электронов / М.В. Еремин, А. А. Алеев, И.М. Ерёмин // Письма в ЖЭТФ.– 2006. – Т. 84. – С. 197-200.
21. Eremin, I. Metallicity of the spin density wave state in iron-based superconductors/I. Eremin, A.V. Chubukov // Phys. Rev. B – 2010. – V. 81. – P. 024511 (14p).
22. Eremin, I. Antiferromagnetism in Iron-Based Superconductors: Selection of Magnetic Order and Quasiparticle Interference/ I. Eremin, J. Knolle, R.M. Fernandes, J. Schmalian, A.V. Chubukov // J. Phys. Soc. Jpn. – 2014. – V. 83. – P. 061015 (6p).
23. Ерёмин, И.М. Антиферромагнетизм в железосодержащих сверхпроводниках: магнитный порядок в системе с коллективизированными электронами // Успехи физических наук. – 2014. – Т. 57. – С. 807-813.

Список цитированной литературы

24. Плакида, Н. М. Высокотемпературные сверхпроводники. -1996. – М: Международная программа образования. – 288 с.
25. Минеев В.П., Самохин К.В. Введение в теорию необычной сверхпроводимости. 1998. - Изд-во. МФТИ. – 144 с.
26. Садовский, М.В. Псевдощель в высокотемпературных сверхпроводниках. // Успехи физических наук. – 2001.– Т. 171.- С. 539–564.
27. Bickers, N.E. Conserving approximations for strongly correlated electron systems: Bethe-Salpeter equation and dynamics for the two-dimensional Hubbard model/ N.E. Bickers, D.J. Scalapino, S.R. White // Phys. Rev. Lett. – 1989. – V. 62 – P. 961-965.
28. Dahm, T. Quasiparticle and spin excitations spectra in the normal and d-wave state of the two-dimensional Hubbard model/ T. Dahm, L. Tewordt// Phys. Rev. Lett. -1995. – V. 74. – P. 793-797.

29. Langer, M. Theory for the excitation spectrum of high- T_c superconductors: quasiparticle dispersion and shadows of the Fermi surface/ M. Langer, J. Schmalian , S. Grabowski, K. H. Bennemann // Phys. Rev. Lett.- 1995. – V. 75. – P. 4508-4512.
30. Johnson, P.D. Doping and Temperature Dependence of the Mass Enhancement Observed in the Cuprate $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$ / P.D. Johnson, T. Valla, A.V. Fedorov, Z. Yusof, B.O. Wells, Q. Li, A.R. Moodenbaugh, G.D. Gu, N. Koshizuka, C. Kendziora, S. Jian, D.G. Hinks // Phys. Rev. Lett. – 2001. – V. 87 – P. 17007-1-17007 (4).
31. Pailhes, S. Resonant magnetic excitations at high energy in superconducting $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.85}$ / S. Pailhes, Y. Sidis, P. Bourges, V. Hinkov, A. Ivanov, C. Ulrich, L.P. Regnault, B. Keimer B.// Phys. Rev. Lett. – 2004 – V. 93 - P. 167001 (4).
32. Shimahara, H. Fragility of the Antiferromagnetic Long-Range-Order and Spin Correlation in the Two-Dimensional t-J Model./ H. Shimahara, S. Takada // Journal of The Physical Society of Japan.–1992–V. 61.-P. 989-997; S. Winterfeld, D. Ihle. Theory of magnetic short-range order in the t-J model/ S. Winterfeld, D. Ihle.// Phys. Rev. B– 1998.– V. 58.-P.9402.
33. Vladimirov, A.A. Dynamic spin susceptibility of superconducting cuprates: A microscopic theory of the magnetic resonance mode / A.A. Vladimirov, D. Ihle, N. M. Plakida // Phys. Rev. B. – 2011.- V. 83. – P. 024411.
34. Sherman, A. Resonance peak in underdoped cuprates /A. Sherman and M. Schreiber// Phys. Rev. B.2003.–V. 68.-P.094519; Sherman, A.Two-dimensional t-J model at moderate doping/ A. Sherman, M. Schreiber // European Physical Journal B. – 2003. – V.32. – P. 203-214; Sherman, A. Evolution of the hole and spin-excitation spectra of the two-dimensional t-J model: From light to heavy doping/ A. Sherman// Phys. Rev. B – 2004.–V. 70. P. 184512.
35. Maeno, Y. Superconductivity in a Layered Perovskite without Copper/ Y. Maeno, H. Hashimoto, K. Yoshida, S. Nishizaki, T. Fujita, J. G. Bednorz and F. Lichtenberg // Nature. -1994. - V. 372. - P. 532-534.

36. Ishida, K. Normal state spin dynamics in Sr₂RuO₄/ K.Ishida, H. Mukuda, Y.Minami, Y Kitaoka, Z.Q.Mao, H. Fukazawa, Y. Maeno// Phys. Rev.B. – 2001. – V. 64. P. 100501-1-100501-4.
37. Mineev V.P. Superconducting phase transition of Sr₂RuO₄ in a magnetic field / V.P. Mineev // Phys. Rev. B – 2014. – V. 89.- P. 134519 (6p.).
38. Садовский, М.В. Высокотемпературная сверхпроводимость в железосодержащих плоскостных соединениях. // Успехи физических наук. – 2008.– Т. 178.- С. 1243–1271.
39. Zheleznyak, A.T. Parquet solution for a flat Fermi surface/ A.T. Zheleznyak, V. M.Yakovenko, I. E. Dzyaloshinskii // Phys. Rev.B, - 1997. – V. 55.P. 3200-3215.
40. Nakai, Y. Evolution from Itinerant Antiferromagnet to Unconventional Superconductor with Fluorine Doping in LaO_{1-x}F_xFeAs Revealed by ⁷⁵As and ¹³⁹La Nuclear Magnetic Resonance / Nakai Y., Ishida K., Kamihara Y., Hirano M., and Hosono H. // J. Phys. Soc. Jpn. – 2008- V. 77.-P. 073701-073708.
41. Matano, K. Spin-singlet superconductivity with multiple gaps in PrO_{0.89}F_{0.11}FeAs/ Matano K., Ren Z. A., Dong X. L., Sun L. L., Zhao Z. X., Zheng G.-q.// Europhys. Lett. – 2008. – V. 83.-P. 57001-57007.